Gabarito

Mecânica Quântica II - FFI 0122

Prova 3 - 26/~~10~~ 11/2015

Duração da Prova: 2 horas

Nome:

Número USP:

1.a

1. **(2,0)** A configuração de estado excitado $(1\,s^1)\ (2\,s^1)$ do átomo de hélio pode existir nos estados singleto e tripleto de spin. Utilizando teoria de perturbação em primeira ordem para interação Coulombiana entre os elétrons, argumente qual dos estados (singleto ou tripleto) tem menor energia.

Denotamos por ψ_{100} e ψ_{200} as funções de onda espaciais dos estados 1s e 2s respectivamente. Sabemos que o estado singleto de spin é antissimétrico e o tripleto simétrico.

Logo podemos ter

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{100}(r_1)\psi_{200}(r_2) + \psi_{100}(r_2)\psi_{200}(r_1)\right]\chi_{singleto}$$

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{100}(r_1)\psi_{200}(r_2) - \psi_{100}(r_2)\psi_{200}(r_1)\right]\chi_{tripleto}$$

A interação Coulombiana entre elétrons é

$$V = \frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}$$

e portanto independente do spin.

A correção de primeira ordem é

$$\Delta E_\pm = \langle\psi_\pm|V|\psi_\pm\rangle =$$

$$= \frac{1}{2}\int d^3r_1\, d^3r_2\, \frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}\left|\psi_{100}(r_1)\psi_{200}(r_2) \pm \psi_{100}(r_2)\psi_{200}(r_1)\right|^2$$

que pode ser escrito como:

$$\Delta E_{\pm} = I \pm J$$

Com

$$I = \int d^3 r_1\, d^3 r_2\, |\psi_{100}(r_1)|^2\, |\psi_{200}(r_2)|^2\, \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$J = \int d^3 r_1\, d^3 r_2\, \psi^*_{100}(r_1)\, \psi^*_{200}(r_2)\, \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, \psi_{100}(r_2)\, \psi_{200}(r_1)$$

Nota que I e J são ambos positivos.

Na verdade, ψ_{100} e ψ_{200} são reais

Portanto

$$\Delta E_+ > \Delta E_-$$

Correção do singleto

Correção do tripleto

Logo os estados tripleto têm menor energia

2.a

2. **(3,0)** Considere tres partículas idênticas de spin 1.

1.5 (a) Suponha que a parte espacial do vetor de estado seja simétrico sob a troca de qualquer par de partículas. Utilizando a notação $\mid m_1\rangle\otimes \mid m_2\rangle\otimes \mid m_3\rangle$, com $m_i = 0\,,\, \pm$, para a componente z do spin de cada partícula, construa os estados de spin normalizados para os seguintes casos:

   i. As tres partículas no estado $\mid +\rangle$

   ii. Duas partículas no estado $\mid +\rangle$ e uma no estado $\mid 0\rangle$

   iii. As tres partículas em estados diferentes

   Qual é o spin total em cada um dos casos acima?

1.5 (b) Tente resolver o mesmo problema para o caso em que a parte espacial do vetor de estado é antisimétrico pela troca de qualquer par de partículas.

Como o spin é 1 as partículas são bosons e portanto o estado tem que ser simétrico pela troca de qualquer par de partículas

(a) Neste caso os estados de spin têm que ser simétricos pois a parte espacial já é simétrica. Logo:

(i) $|\psi\rangle = |+\rangle \otimes |+\rangle \otimes |+\rangle$ $\quad (J = 3)$

(ii) $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[|+\rangle \otimes |+\rangle \otimes |0\rangle + |+\rangle \otimes |0\rangle \otimes |+\rangle + |0\rangle \otimes |+\rangle \otimes |+\rangle\right]$

$(J = 2)$

(iii)

(J = 0)

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\Big[|+\rangle\otimes|0\rangle\otimes|-\rangle + |-\rangle\otimes|+\rangle\otimes|0\rangle$$
$$+ |0\rangle\otimes|-\rangle\otimes|+\rangle$$
$$+ |0\rangle\otimes|+\rangle\otimes|-\rangle + |-\rangle\otimes|0\rangle\otimes|+\rangle$$
$$+ |+\rangle\otimes|-\rangle\otimes|0\rangle \Big]$$

(b) Neste caso os estados de spin têm que ser antisimétricos pois o estado espacial já é antisimétrico. Portanto, não podemos ter spin iguais e consequentemente i) e (ii) não são possíveis.

(iii)

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\Big[|+\rangle\otimes|0\rangle\otimes|-\rangle + |-\rangle\otimes|+\rangle\otimes|0\rangle$$
$$+ |0\rangle\otimes|-\rangle\otimes|+\rangle$$
$$- |0\rangle\otimes|+\rangle\otimes|-\rangle - |-\rangle\otimes|0\rangle\otimes|+\rangle$$
$$- |+\rangle\otimes|-\rangle\otimes|0\rangle \Big]$$

(J = 0)

3. **(5,0)** Considere duas partículas idênticas submetidas ao potencial de um oscilador harmônico unidimensional, de tal maneira que a Hamiltoniana do sistema é

$$H_0 = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} + \frac{1}{2} m\,\omega^2 \left(X_1^2 + X_2^2\right)$$

onde X_i e P_i, $i = 1, 2$ são os operadores posição e momento, respectivamente, de cada partícula, m é a massa de cada partícula e ω a frequência dos oscilador.

1.5 (a) Suponha que as partículas sejam bosons de spin 0.

i. Construa todos os estados permitidos para este sistema.

ii. Qual a energia destes estados?

iii. Qual a degenerescência de cada nível energia?

1.5 (b) Suponha agora que as partículas sejam férmions de spin 1/2. Responda as mesmas tres perguntas acima para este caso.

2.0 (c) Suponha que o sistema seja submetido a uma perturbação de tal maeira que a Hamiltoniana passe a ser dada por

$$H = H_0 + V \qquad \text{com} \qquad V = \varepsilon\, X_1\, X_2$$

com H_0 dada acima, com ε sendo um parâmetro pequeno.

0.7 i. Calcule a correção da energia, em primeira ordem em teoria de perturbação, para os estados fundamentais dos sitemas bosônico e fermiônico, descritos acima.

1.3 ii. Calcule a correção das energias, em primeira ordem em teoria de perturbação, para os dois primeiros estados excitados do sitemas bosônico descrito acima

Comentários: Utilize a notação $|\, n_1\,,\, n_2\rangle$ para o estado $|\, \varphi_{n_1}\rangle \otimes |\, \varphi_{n_2}\rangle$, onde $|\, \varphi_n\rangle$ são os estados normalizados do oscilador harmônico descritos na "Colinha".
Utilize a notação $|\, s_1\,,\, s_2\rangle$, com $s_i = \pm$, $i = 1, 2$, para os estados de spin 1/2 das partículas.
Utilize o fato que, de acordo com a "Colinha", $X_i = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a_i^\dagger + a_i\right)$.

(a) Como são bósons o estado tem que ser totalmente simétrico. Como o spin é nulo temos somente os estados dos osciladores:

$$|\psi^B_{n_1,n_2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|n_1,n_2\rangle + |n_2,n_1\rangle\,\right] \qquad n_1 \neq n_2$$

$$= |n_1,n_1\rangle \qquad n_1 = n_2 \qquad (a.i)$$

com $n_i = 0,1,2\ldots$

A energia é

$$E^B_{n_1,n_2} = \hbar\omega\left(n_1 + n_2 + 1\right) \qquad (a.ii)$$

$$= \hbar\omega\,(N+1) \qquad N = n_1 + n_2$$

A degenerescência é dada pela partição do inteiro N, ou seja $(N,0), (N-1,1) \ldots (0,N)$,

Portanto, devido à simetria temos

$$\text{degenerescência } E^B_{n_1,n_2} = \begin{cases} \dfrac{N+1}{2} & \text{p/ } N \text{ ímpar} \\[2mm] \dfrac{N+2}{2} & \text{p/ } N \text{ par} \end{cases} \qquad (a.iii)$$

(b) No caso de férmions de spin 1/2 temos as seguintes possibilidades

$$(n_1 \neq n_2)$$

$$|\psi^{F,s}_{n_1,n_2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|n_1,n_2\rangle + |n_2 n_1\rangle\right) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle - |-+\rangle\right)$$

$$= |n_1,n_1\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle - |-+\rangle\right) \qquad (n_1 = n_2)$$

e

$$|\psi^{F,t}_{n_1,n_2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|n_1,n_2\rangle - |n_2 n_1\rangle\right) \otimes \begin{cases} |++\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle + |-+\rangle\right) \\ |--\rangle \end{cases} \qquad (n_1 \neq n_2)$$

(b.i)

A energia é a mesma do caso bosônico, ou seja

$$E^{F}_{n_1,n_2} = \hbar\omega\left(n_1+n_2+1\right) = \hbar\omega(N+1) \qquad (6.ii)$$

com $N = n_1 + n_2$

A degenerescência do singleto é a mesma do caso bosônico, ou seja

$$\text{degenerescência } \underline{\text{singleto}}\ E^{F,s}_{n_1,n_2} = \begin{cases} \frac{N+1}{2} & N \text{ ímpar} \\ \frac{N+2}{2} & N \text{ par} \end{cases}$$

No caso tripleto temos

$$\text{degenerescência } \underline{\text{tripleto}}\ E^{F,t}_{n_1,n_2} = \begin{cases} 3\,\frac{(N+1)}{2} & N \text{ ímpar} \\ 3\,\frac{N}{2} & N \text{ par} \end{cases}$$

Logo a degenerescência total

$$\text{degenerescência total } E^{F}_{n_1,n_2} = \begin{cases} 2(N+1) & N \text{ ímpar} \\ 2N+1 & N \text{ par} \end{cases}$$

(6.iii)

(c) O estado fundamental nos dois casos corresponde a $N=0$, ou seja $n_1 = n_2 = 0$. Logo

$$|\psi^B_{fund.}\rangle = |00\rangle$$

$$|\psi^F_{fund}\rangle = |00\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle - |-+\rangle\right)$$

Como são não degenerados a correção de primeira ordem é $\langle\psi_{fun}|V|\psi_{fund}\rangle = \Delta E^{(1)}$. Temos

$$V = \frac{\hbar\varepsilon}{2m\omega}(a_1^+ + a_1)(a_2^+ + a_2) =$$

$$= \frac{\hbar\varepsilon}{2m\omega}\left(a_1^+a_2^+ + a_1a_2 + a_1^+a_2 + a_1a_2^+\right)$$

Temos que $a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$ e $a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$

Logo:

$$\langle\psi^{B,F}_{fund}|V|\psi^{B,F}_{fund}\rangle = \frac{\hbar\varepsilon}{2m\omega}\langle 00|a_1^+a_2^+ + a_1a_2 + a_1^+a_2 + a_1a_2^+|00\rangle$$

$$= 0$$

Ou seja, os estados fundamentais não sofrem correção de primeira ordem na energia.

(c.i)

O primeiro estado excitado do caso bosônico é

$$|\psi^B_{01}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|01\rangle + |10\rangle\right)$$

Como é não degenerado temos:

$$\Delta E^{(1)} = \langle \psi^B_{01}|V|\psi^B_{01}\rangle =$$

$$= \frac{1}{2}\frac{\hbar\varepsilon}{2m\omega}\left(\langle 01| + \langle 10|\right)\left(a_1^+ a_2^+ + a_1 a_2 + a_1^+ a_2 + a_1 a_2^+\right) *$$

$$* \left(|01\rangle + |10\rangle\right)$$

$$= \frac{1}{2}\frac{\hbar\varepsilon}{2m\omega}\left(\langle 01| + \langle 10|\right)\left(|10\rangle + |01\rangle\right) = \frac{\hbar\varepsilon}{2m\omega}$$

Logo a correção em primeira ordem é

$$\Delta E^{(1)}_{01} = \frac{\hbar\varepsilon}{2m\omega}$$

O segundo estado excitado é duplamente degenerado

$$|\psi^B_{11}\rangle = |11\rangle$$

$$|\psi^B_{02}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|02\rangle + |20\rangle\right)$$

Neste caso temos que aplicar teoria de perturbação para o caso degenerado.

3.e

Temos

$$V|\psi_{11}^B\rangle = \frac{\hbar\varepsilon}{2m\omega}\left(\sqrt{2}\sqrt{2}|22\rangle + |00\rangle + \sqrt{2}|20\rangle + \sqrt{2}|02\rangle\right)$$

$$V|\psi_{02}^B\rangle = \frac{\hbar\varepsilon}{2m\omega}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{3}|13\rangle + \sqrt{2}|11\rangle + \sqrt{3}|31\rangle + \sqrt{2}|11\rangle\right)$$

Portanto

$$\langle\psi_{11}^B|V|\psi_{11}^B\rangle = \langle\psi_{02}^B|V|\psi_{02}^B\rangle = 0$$

$$\langle\psi_{02}^B|V|\psi_{11}^B\rangle = \langle\psi_{11}^B|V|\psi_{02}^B\rangle = \frac{\hbar\varepsilon}{m\omega}$$

Temos que diagonalizar a matriz

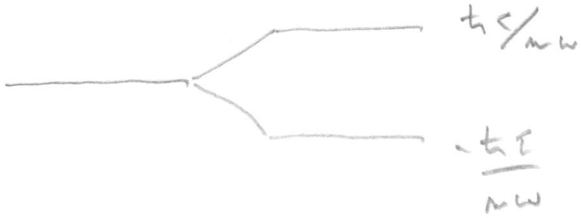
$$V = \frac{\hbar\varepsilon}{m\omega}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \det\begin{pmatrix} \lambda & -\hbar\varepsilon/m\omega \\ -\frac{\hbar\varepsilon}{m\omega} & \lambda \end{pmatrix} =$$

$$= \lambda^2 - \left(\frac{\hbar\varepsilon}{m\omega}\right)^2$$

Logo temos duas correções de sinais opostos

$$\Delta E^{(1)} = \pm\frac{\hbar\varepsilon}{m\omega}$$

(c, ii)



“Colinha”

1. A equação de Schrödinger é

$$i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\,\psi$$

2. A Hamiltoniana do oscilador harmônico unidimensional é dada por

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\,\omega^2 X^2 = \hbar\,\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)$$

onde

$$[X\,,\,P] = i\,\hbar$$

e

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} + i\,\hat{P}\right) \qquad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} - i\,\hat{P}\right) \qquad \left[a\,,\,a^\dagger\right] = 1$$

com

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}\,X \qquad \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\,\omega\,\hbar}}\,P$$

Os autoestados de H são denotados

$$H\mid\varphi_n\rangle = \hbar\,\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\mid\varphi_n\rangle \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

e são obtidos a partir do estado de menor energia por

$$\mid\varphi_n\rangle = \frac{\left(a^\dagger\right)^n}{\sqrt{n!}}\mid\varphi_0\rangle \qquad \langle\varphi_m\mid\varphi_n\rangle = \delta_{m\,,\,n}$$

As funções de onda normalizadas dos tres primeiros estados são

$$\begin{aligned}
\langle x\mid\varphi_0\rangle &= \left(\frac{m\,\omega}{\pi\,\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\,\omega}{2\,\hbar}\,x^2} \\
\langle x\mid\varphi_1\rangle &= \left[\frac{4}{\pi}\left(\frac{m\,\omega}{\hbar}\right)^3\right]^{1/4} x\,e^{-\frac{m\,\omega}{2\,\hbar}\,x^2} \\
\langle x\mid\varphi_2\rangle &= \left(\frac{m\,\omega}{4\,\pi\,\hbar}\right)^{1/4}\left[2\,\frac{m\,\omega}{\hbar}\,x^2 - 1\right] e^{-\frac{m\,\omega}{2\,\hbar}\,x^2}
\end{aligned}$$

3. No espalhamento estacionário consideramos a Hamiltoniana

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\,m} + V\,(\vec{r})$$

A forma assintótica da função de onda é

$$v_k^{(\mathrm{diff})}\,(\vec{r}) \sim e^{i\,\vec{k}_i\cdot\vec{r}} + f_k\,(\theta\,,\,\varphi)\,\frac{e^{i\,k\,r}}{r} \qquad\qquad r \to \infty$$

A equção integral é

$$v_k^{(\mathrm{diff})}\,(\vec{r}) = e^{i\,\vec{k}_i\cdot\vec{r}} + \int d^3\vec{r}\,' G_+\,(\vec{r} - \vec{r}\,')\;U\,(\vec{r}\,')\;v_k^{(\mathrm{diff})}\,(\vec{r}\,')$$

onde

$$V = \frac{\hbar^2}{2\,m}\,U \qquad\qquad G_+\,(\vec{r}) = -\frac{1}{4\,\pi}\,\frac{e^{i\,k\,r}}{r}$$

Temos ainda que

$$f_k\,(\theta\,,\,\varphi) = -\frac{1}{4\,\pi}\int d^3\vec{r}\,' e^{-i\,\vec{k}_d\cdot\vec{r}\,'}\;U\,(\vec{r}\,')\;v_k^{(\mathrm{diff})}\,(\vec{r}\,')$$

4. Na teoria de perturbação independente do tempo consideramos

$$H = H_0 + \lambda\,V$$

onde H_0 é a Hamiltoniana não perturbada e V a perturbação. Os estados não perturbados e perturbados satisfazem

$$H_0 \mid n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} \mid n^{(0)}\rangle \qquad\qquad H \mid n\rangle = E_n \mid n\rangle$$

Fazemos a expansão perturbative

$$\mid n\rangle = \mid n^{(0)}\rangle + \lambda \mid n^{(1)}\rangle + \lambda^2 \mid n^{(2)}\rangle + \ldots \qquad\qquad \Delta_n = \lambda\,\Delta_n^{(1)} + \lambda^2\,\Delta_n^{(2)} + \ldots$$

onde $\Delta_n = E_n - E_n^{(0)}$. Temos que

$$\Delta_n^{(1)} = V_{n\,n} \qquad\qquad \Delta_n^{(2)} = \sum_{l \neq n} \frac{\mid V_{n\,l}\mid^2}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}$$

com $V_{n\,l} = \langle n^{(0)} \mid V \mid l^{(0)}\rangle$.